

基态 XO^{n+} ($X=Ru, Rh, Pd; n=0, 1$)的势能函数和第一垂直电离势

王蓉, 蒋刚, 蒙大桥, [朱正和](#)

四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065|中国工程物理研究院表面物理与化学国家重点实验室, 四川 绵阳 621907

摘要:

运用原子分子反应静力学原理推导出 XO^{n+} ($X=Ru, Rh, Pd; n=0, 1$)的基态电子状态及离解极限. 运用密度泛函的B3P86方法和LANL2DZ 赝势基组及aug-cc-pVTZ全电子基组, 对 XO^{n+} ($X=Ru, Rh, Pd; n=0, 1$)体系进行计算, 获得了这些分子及其离子基态的Murrell-Sorbie解析势能函数. 同时计算了 XO^{n+} ($X=Ru, Rh, Pd; n=0, 1$)的光谱数据, 计算了 XO ($X=Ru, Rh, Pd$)中性分子的第一垂直电离势.

关键词: XO^{n+} ($X=Ru, Rh, Pd; n=0, 1$) 势能函数 垂直电离势

收稿日期 2008-12-25 修回日期 2009-03-17 网络版发布日期 2009-04-06

通讯作者: 朱正和 Email: zhuxm@scu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(181KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ [\$XO^{n+}\$ \(\$X=Ru, Rh, Pd\$ \)](#)

▶ [\$n=0, 1\$](#)

▶ [势能函数](#)

▶ [垂直电离势](#)

本文作者相关文章

▶ [王蓉](#)

▶ [蒋刚](#)

▶ [蒙大桥](#)

▶ [朱正和](#)